КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ МЕЖДУ ОСРЕДНЕННЫМИ И ТОЧЕЧНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ ГЛАДКИХ ФУНКЦИЙ

В.А.Гордин НИУ ВШЭ & Гидрометцентр РФ

Общая идея компактных соотношений между двумя видами сеточных величин, известных и неизвестных, состоит в том, чтобы вместо использования явных формул и последовательного вычисления искомых неизвестных в каждой точке сетки, написать неявные соотношения (по одному для каждой точки сетки), объединить их в систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) сразу для всех неизвестных значений, а затем эту СЛАУ решить. Такой подход аналогичен переходу от полиномиальной интерполяции к интерполяции рациональными функциями.

В каждое соотношение входит лишь несколько значений каждого вида. Выбор этих значений вокруг “центральной” точки описывается шаблонами (множествами точек сетки, где коэффициенты соотношения отличны от нуля) для каждого из видов. Поскольку шаблоны включают лишь малое число точек сетки, матрицы таких СЛАУ оказываются разреженными, и их решение требует сравнительно небольшое число арифметических операций, притом, что порядок аппроксимации таких алгоритмов оказывается выше, чем у аналогичных явных (классических). Если шаблон для одного из двух видов величин состоит из только одной точки, получается явная формула для соответствующей величины, и СЛАУ решать не нужно. Аналог: при нулевой степени знаменателя рациональной функции получается полином. Для таких явных схем порядок точности конечно-разностных формул может быть повышен за счет расширения второго шаблона. Такое расширение шаблона может привести к иным проблемам. Например, если “центральная” точка шаблона расположена вблизи границы отрезка, то крайние точки шаблона не включены в отрезок, и там значения не определены. Довольно распространенная ситуация: известных граничных условий не хватает, чтобы восполнить незнание значений в точках шаблона “вылезших за пределы расчетной области”.

Общеизвестным и важнейшим классом соотношений между осредненными и точечными значениями являются квадратурные формулы. На отрезке или окружности заданы точки $\{x_j\}_{j=0}^{n}$ (в случае окружности $x_n = x_0$) Известны только значения функции $u(x)$ в этих точках. Требуется оценить интеграл от функции u по этим отрезку или окружности. Таких квадратурных формул, обладающих различными полезными свойствами, очень много. Например, весьма популярны формулы трапеций, Симпсона и формулы, основанные на сплайн-интерполяции Шонберга.

Сплайны Шонберга позволяют оценивать не только интеграл по всему отрезку (окружности), но и по каждому подотрезку отдельно. Здесь будет рассмотрены алгоритмы решения именно такой задачи: определить интегралы по всем подотрезкам $[x_j, \ x_{j+1}]$. Необходимость в такой оценке всех интегралов с высокой точностью возникает, например, при построении компактной конечно-разностной схемы численного решения дифференциального уравнения с переменными коэффициентами. В частности, для уравнений

$$\kappa d_x u = f \text{ и } \kappa d_x[\kappa d_x u] = f$$

где κ, f – заданные комплексно-значные функции (причем $\kappa = 0$), в компактной схеме используются интегралы

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{dx}{\kappa}, \quad j = 0, \ldots, n-1,$$

которые должны быть вычислены с высокой точностью.

Также здесь будет рассмотрена и обратная задача: по такому набору интегралов оценить значения функции (или ее производной) в точках $\{x_j\}_{j=0}^{n}$. Потребность такого рода возникает, например, при обработке спутниковых наблюдений, когда прибор на спутнике производит измерение осредненной по квадратику (пикселю) величины (температуры, влажности, плотности облачности), а на выходе нужно иметь значения наблюдаемой функции в точках регулярной сетки. Эти точки могут совпадать с углами квадратиков, или располагаться в их центрах. Во втором случае будем называть компактную схему шахматной.

Еще один вариант задачи такого рода: оценка не самой функции, а ее производной функции в точках сетки по значениям интегралов по подотрезкам.

В настоящей работе рассмотрены только одномерные задачи. Переход к многомерным задачам (и многомерным шаблонам) достаточно очевиден. Разнообразные варианты использования компактных конечно-разностных схем высокого порядка точности для аппроксимации дифференциальных уравнений (обыкновенных и в частных производных) с переменными коэффициентами и даже слабо нелинейных рассматривались многими авторами, особенно в последние годы.

Возможное обобщение: компактные соотношения устанавливаются не между двумя видами величин, а скажем, между тремя: 1) интегралами по подотрезкам, 2) значениями функции в точках сетки, 3) значениями ее производной в точках (возможно, другой) сетки. В этом случае используется не обычная рациональная функция, а «векторная», включающая не два, а три (или более) многочлена.

Оценка интегралов по подотрезкам. Классические формулы

Пусть задана в 2 точках $x = \pm h/2$ функция $u(x)$. Нужно оценить интеграл

$$I = \int_{-h/2}^{h/2} u(x)dx.$$

Оптимальная (в самых разных смыслах) квадратурная формула – формула трапеций:

$$I \approx u(-h/2) + u(h/2),$$

однако, даже на квадратичной функции $u(x) = x^2$ эта формула не точна.

Пусть теперь функция $u(x)$ задана в 4 точках $x = \pm h/2, \pm 3h/2$. Оцениваемый функционал четный, поэтому формулу ищем в виде

$$I \approx p\frac{u(-h/2) + u(h/2)}{2} + q\frac{u(-3h/2) + u(3h/2)}{2}$$

Поскольку на тестовых функциях — мономах с произвольной нечетной степенью $u_k = x^k$ — обе части приближенного равенства совпадают, уравнения составляем только для четных степеней: $k = 0$, 2:

k	x^k	Уравнение
0	1	$p + q = h$
2	x^2	$ph^2/4 + 9qh^2/4 = h^3/12$

$$\Rightarrow p = 13h/12,\ q = -h/12.$$

Если же использовать не 4-х точечный, а 6-точечный шаблон:

$$I \approx p\frac{u(-h/2) + u(h/2)}{2} + q\frac{u(-3h/2) + u(3h/2)}{2} + r\frac{u(-5h/2) + u(5h/2)}{2},$$

то в список тестовых функций можно добавить еще и моном x^4. Получаем СЛАУ 3-го порядка:

k	x^k	уравнение
0	1	$p + q + r = h$
2	x^2	$ph^2/4 + 9qh^2/4 + 25rh^2/4 = h^3/12$
4	x^4	$ph^4/16 + 81qh^4/16 + 625rh^4/16 = h^5/80$

$$\Rightarrow p = 802h/720,\ q = -93h/720,\ r = 11h/720.$$

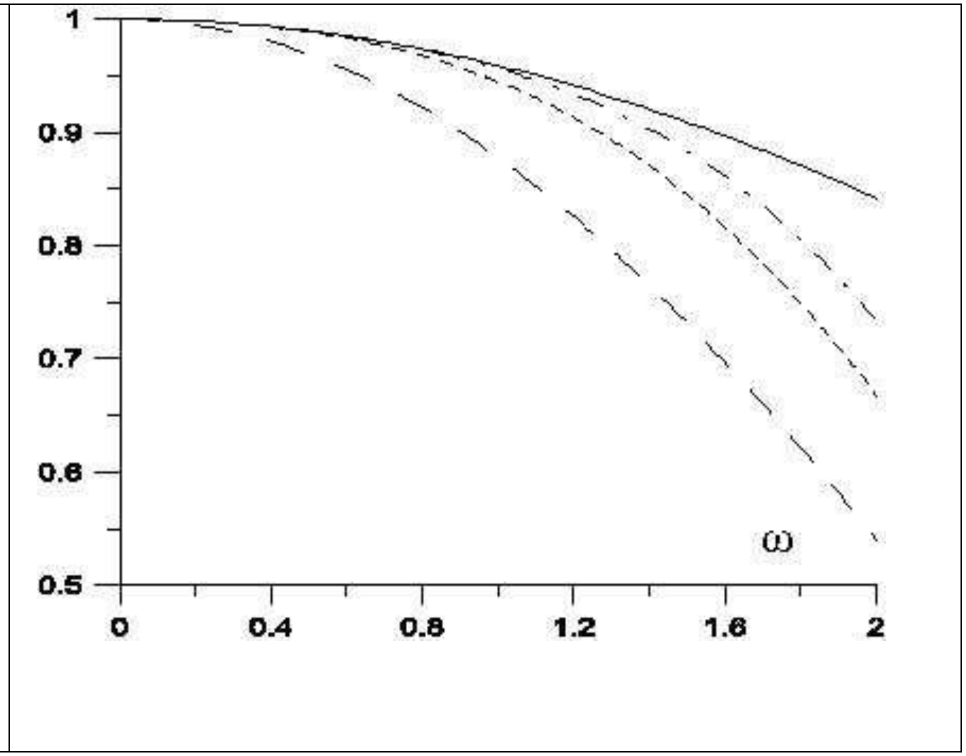
Проверку точности полученных формул проведем на пробных функциях $\exp(i\xi x)$ при малых значениях безразмерной длины волны $\omega = \xi h$. Точное значение интеграла легко вычислить аналитически:

$$I = \int_{-h/2}^{h/2} \exp(i\xi x)\,dx = 2h\frac{\sin(\omega/2)}{\omega}.$$

Приближенная формула для оценки величины I:

$$\Omega(\omega) = p\cos(\omega/2) + q\cos(3\omega/2) + r\cos(5\omega/2).$$

Рис.1 Символы классических квадратурных формул для аппроксимации интеграла по отрезку [$h/2$, $h/2$]. Сплошная линия — точное значение интеграла. Крупный пунктир — для квадратурной формулы с 2-точечным шаблоном (формула трапеций), мелкий пунктир — для квадратурной формулы с 4-точечным шаблоном и штрих-пунктир — с 6-и точечным.



Если точки в которых известна функция $u(x)$, от которой берется интеграл (или, наоборот, точки в которых нужно вычислить значения функции по значениям интегралов по пикселям), не совпадают с границами отрезка интегрирования, а отличаются от них на полшага, то коэффициенты определяются аналогичным образом.

Если значение функции известно лишь в одной точке (середине отрезка интегрирования, т.е. при $x = 0$, то коэффициент очевиден, — он равен h.

Если значение функции известно в трех точках ($x = 0, \pm h$), т.е. нужно определить коэффициенты формулы

$$I \approx pu(0) + q\frac{u(-h)+u(h)}{2},$$

то, используя тестовые функции x^0, x^2, получаем СЛАУ второго порядка:

$$p+q=1, \quad qh^2 = h^3/12,$$

откуда $q = h/12$, $p = 11h/12$

Для пятиточечного шаблона ($x = 0$, $\pm h$, $\pm 2h$) и формулы

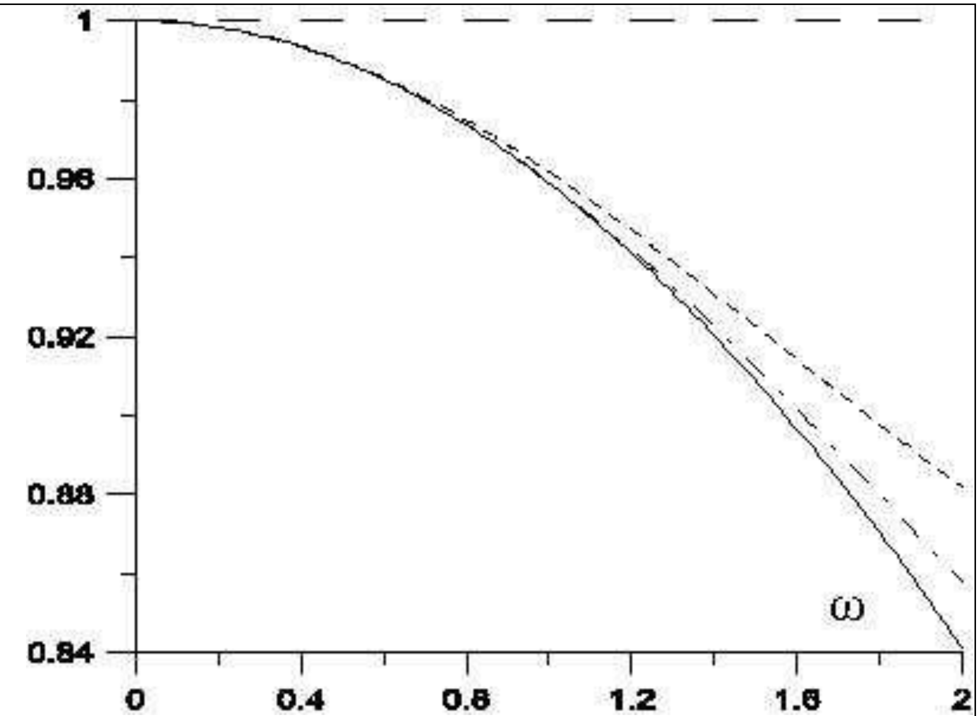
$$I \approx pu(0) + q\frac{u(-h)+u(h)}{2} + r\frac{u(-2h)+u(2h)}{2},$$

получается СЛАУ 3-го порядка, решение которой

$$p = \frac{2589h}{2880},\ q = \frac{308h}{2880},\ r = \frac{-17h}{2880}.$$

Символы этих формул показаны на Рис 2. Сравнение с Рис 1 показывает некоторое преимущество шахматных схем.

Рис.2. Символы классических “шахматных” квадратурных формул для аппроксимации интеграла по отрезку [$h/2, h/2$]. Сплошная линия — символ для точного значения интеграла. Крупный пунктир — для квадратурной формулы с 1-точечным шаблоном (значение функции в центре отрезка, умноженное на длину h), мелкий пунктир — для квадратурной формулы с 3-х точечным шаблоном и штрих-пунктир— с 5-и точечным.



Если решается задача о восстановлении значений функции по интегралам на подотрезках, то нужно обратить в последнем случае пятидиагональную матрицу (в предпоследнем — трехдиагональную), где на главной диагонали стоит число p, на соседних q, а на следующих — число r. В случае сетки на окружности (периодических граничных условий) ненулевые элементы матрицы также имеются в правом верхнем и левом нижнем углах. Для задачи на отрезке (т.е. сетка точек лежит на отрезке) нужны дополнительные граничные условия: в последнем случае по два, а в предпоследнем — по одному на каждом краю отрезка.

Главные диагонали этих трехдиагональной и пятидиагональной матриц доминируют, а значит, матрицы, по теореме Гершгорина, обратимы.

Компактный метод оценки интегралов

Определим коэффициенты в соотношении

$$\alpha\left[\int_{h/2}^{3h/2} u(x)\,dx + \int_{-3h/2}^{-h/2} u(x)\,dx\right] + \beta\int_{-h/2}^{h/2} u(x)\,dx = [u(-h/2)+u(h/2)]/2,$$

обеспечивающие самый высокий порядок точности для гладких функций $u(x)$. В качестве тестовых используем функции $u_k = x^k$ при четных k (поскольку задача симметрична). При $k = 0$ получаем уравнение

$$2\alpha I_{0,+} + \beta I_{0,0} = 2\alpha h + \beta h = 1,$$

а при $k = 2$ — уравнение

$$2\alpha I_{2,+} + \beta I_{2,0} = 2(h/2)^2,\ \alpha h^3\frac{26}{12} + \beta h^3\frac{1}{12} = h^2/4 \Leftrightarrow \alpha = h^{-1}\frac{1}{12},\ \beta = h^{-1}\frac{10}{12}.$$

Символ функционала задается формулой (график см. Рис. 3):

$$\sigma_{2,1} = 12\frac{\cos(\omega/2)}{10+2\cos(\omega/2)}.$$

В матрице, где на главной диагонали стоит число $\beta = 10/12$, а на соседних $\alpha = 1/12$, диагональ доминирует. По теореме Гершгорина это обратимая (и хорошо обусловленная) матрица.

Для второй матрицы на главной диагонали нули, а элементы на соседних диагоналях (а также в верхнем правом и нижнем левом углах) равны 1/2; остальные числа равны нулю. В случае периодической задачи спектр можно определить с помощью дискретного преобразования Фурье. Вырожденность такой матрицы зависит от четности числа подотрезков. Для четного числа матрица вырождена, поскольку сумма всех ее строк с альтернирующим знаком дает нулевую строку. Для нечетного числа эта матрица хотя и не вырождена, но при малых h плохо обусловлена.

Если вместо периодических граничных условий использовать, например, условия Дирихле (в упомянутых углах матрицы числа 1/2 заменяются нулями), то матрица будет невырожденной при любой четности n, но с ростом n ее обусловленность монотонно ухудшается.

Если увеличить число точек в компактном соотношении между осредненными и локализованными значениями:

$$\alpha\left[\int_{h/2}^{3h/2} u(x)\,dx + \int_{-3h/2}^{-h/2} u(x)\,dx\right] + \beta\int_{-h/2}^{h/2} u(x)\,dx =$$

$$= [u(-h/2) + u(h/2)]/2 + p[u(-3h/2) + u(3h/2)]/2,$$

то получим СЛАУ третьего порядка для трех неизвестных коэффициентов. В качестве тестовых используем функции $u_k = x^k$ при $k = 0, 2, 4$:

$$
\begin{aligned}
2\alpha h + \beta h &= 1 + p, \\
\alpha h^3 \frac{26}{12} + \beta h^3 \frac{1}{12} &= h^2/4 + 9ph^2/4, \\
2\alpha h^5 \frac{121}{80} + \beta h^5 \frac{1}{80} &= h^4/16 + 81ph^4/16
\end{aligned}
$$

Решение этой СЛАУ единственно: $p = \frac{6}{54}$, $\alpha = \frac{11}{54}$, $\beta = \frac{38}{54}$. Символ функционала задается формулой (график см. Рис. 3):

$$
\sigma_{2,2} = 12\frac{27\cos(\omega/2) + 3\cos(3\omega/2)}{19 + 11cos(\omega/2)}.
$$

В трехдиагональной матрице, где на главной диагонали число β, а на соседних диагоналях α, главная диагональ доминирует, и, по теореме Гершгорина, такая матрица невырождена.

Для определения вырожденности второй матрицы нужно оценить поведение символа — знаменателя $\sigma_{2,2}(\omega)$. Это знакопеременная функция. И хотя она определена не на вещественной прямой, а на дискретной сетке точек, при больших n она может принимать очень маленькие значения, т.е. эта матрица будет плохо обусловлена.

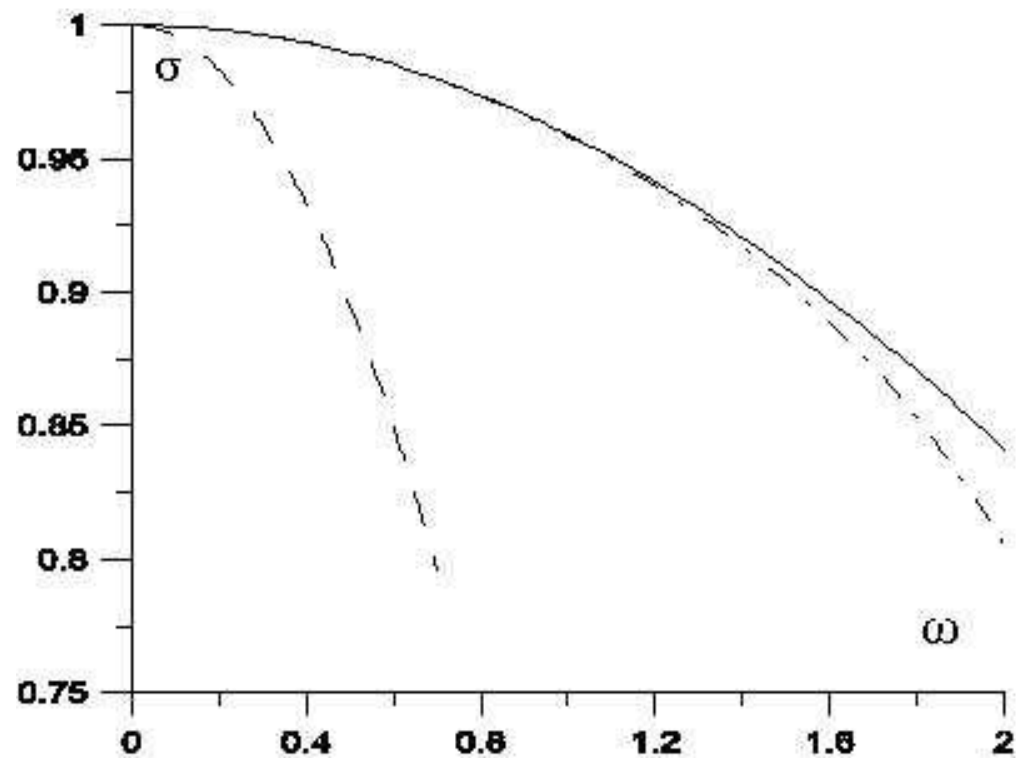


Рис.3. Символы компактных квадратурных формул для аппроксимации интеграла по отрезку [$h/2$, $h/2$]. Сплошная линия — символ для точного значения интеграла. Крупный пунктир — символ $\sigma_{2,1}(\omega)$, штрих-пунктир — символ $\sigma_{2,2}(\omega)$.

Приложение. Несколько простых одномерных интегралов.
Эти интегралы от элементарных функций используются при составлении СЛАУ и при проверке точности получившихся соотношений.

$$1.\ I_{k,0} = \int_{-h/2}^{h/2} x^k\,dx = \frac{h^{k+1}}{2^{k+1}(k+1)}\left[1+(-1)^k\right].$$

$$2.\ I_{k,+} = \int\limits_{h/2}^{3h/2} x^k\,dx = \frac{h^{k+1}\left[3^{k+1}-1\right]}{2^{k+1}(k+1)}; \quad I_{k,-} = \int\limits_{-3h/2}^{-h/2} x^k\,dx = (-1)^k I_{k,+}.$$

$$3.\ J_0(\omega) = \int\limits_{-h/2}^{h/2} \exp(i\xi x)\,dx = 2\frac{\sin(\xi h/2)}{\xi} = 2h\frac{\sin(\omega/2)}{\omega}.$$

$$4.\ J_+(\omega) = \int\limits_{h/2}^{3h/2} \exp(i\xi x)\,dx = \exp(i\omega)J_0(\omega),\ \ J_-(\omega) = \exp(-i\omega)J_0(\omega).$$

–

Компактный вариант определения интегралов. Шахматная сетка.

Для всех $j = 1, \dots, N-1$ составим соотношения

$$\alpha\left[\int\limits_{-3h/2}^{-h/2} u(x)\,dx + \int\limits_{h/2}^{3h/2} u(x)\,dx\right] + \beta\int\limits_{-h/2}^{h/2} u(x)\,dx = u(0) + p\frac{u(-h)+u(h)}{2}. \tag{15.16}$$

Из предположений о точности компактной аппроксимации (15.16) на тестовых функциях $u_k = x^{2k}$, $k = 0, 1, 2$ получаем СЛАУ порядка 3

№	u_k	Уравнение
1	1	$h(2\alpha + \beta) = 1 + p$
2	$x2$	$h^3(26\alpha + \beta)/12 = h^2p$
3	$x4$	$h^5[242\alpha + \beta]/80 = h^4p$

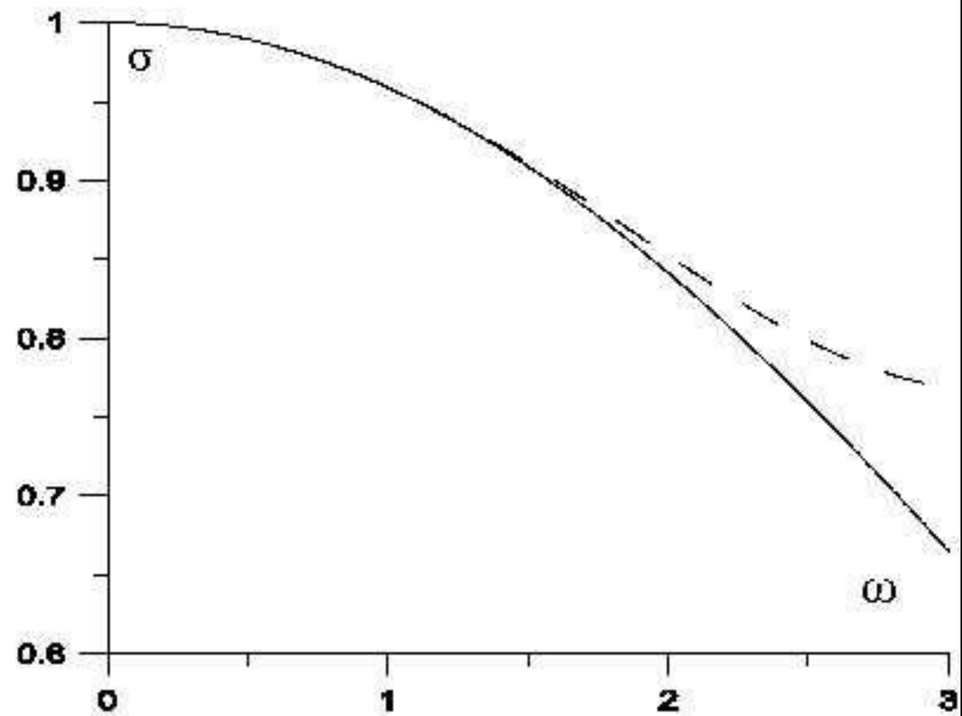
Решение этой СЛАУ: $p = \dfrac{9}{31}$, $\alpha = \dfrac{17}{186h}$ $\beta = \dfrac{206}{186h}$.

Символ функционала задается формулой

$$\sigma_{comp-chess} = 3\frac{31 + 9\cos(\omega)}{103 + 17\cos(\omega)},$$

и его график на Рис. 4. Сравнение с другими графиками показывает лучшее качество аппроксимации именно этого варианта компактной схемы при одинаковых вычислительных трудозатратах.

Рис.4. Символы компактной квадратурной формулы для аппроксимации интеграла по отрезку $[-h/2, h/2]$. Сплошная линия — точное значение интеграла. Пунктир — символ $\sigma_{comp-chess}(\omega)$.



СРЕДНИЕ ПО ПИСКСЕЛЮ И ТОЧЕЧНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ

С учетом результатов сравнения различных одномерных вариантов, в двумерной задаче ограничимся рассмотрением компактных схем на шахматной сетке. Определим коэффициенты соотношения между средними значениями функции u по квадратикам

$$I_{j,k}[u] = \int_{(j-1/2)h}^{(j+1/2)h} \int_{(k-1/2)h}^{(k+1/2)h} u(x,y)\,dxdy$$

и значениями функции u в узлах сетки $\langle kh, jh \rangle$— узлы находятся в центрах квадратиков.

Используем девятиточечные шаблоны для обоих полей при составлении компактной схемы. Также используем симметрию относительно осей координат и относительно диагоналей:

$$aI_{0,0} + b\big[I_{-1,0} + I_{0,-1} + I_{1,0} + I_{0,1}\big]/4 + c\big[I_{-1,-1} + I_{1,-1} + I_{-1,1} + I_{1,1}\big]/4 =$$
$$= u(0,0) + p[u(0,-h) + u(0,h) + u(-h,0) + u(h,0)]/4 +$$
$$+q[u(-h,-h) + u(-h,h) + u(h,-h) + u(h,h)]/4.$$

Для обеспечения 4-го порядка точности нужно использовать 4 тестовые функции, а 6-го — 6 штук. Поэтому на шаблонах “квадрат — квадрат” 6-й порядок обеспечить нельзя, а 4-й можно и притом разными способами.

Замечание А. В случае прямоугольной сетки, где шаги по переменным x и y различны, симметрии относительно диагоналей нет. Нужно увеличить число коэффициентов ($b \Rightarrow b_1$, b_2, $p \Rightarrow p_1$, p_2) и добавить еще две тестовые функции.

В общем случае СЛАУ 4-го порядка для определения 5 коэффициентов приведена в Таблице. Рассмотрим шаблоны “крест – квадрат” ($c = 0$) и “квадрат – крест” ($q = 0$), см. Рис. 5.

Таблица. Тестовые функции и СЛАУ для коэффициентов двумерного компактного соотношения

№	u_k	Уравнение
1	1	$h^2(a + b + c) = 1 + p + q$
2	x^2	$h^4(a + 7b + 13c)/12 = h^2(2p + 4q)/4$
3	x^4	$h^6[a + b(2 + 2 \cdot 121)/4 + c(4 \cdot 121/4)]/80 = h^4(2p + 4q)/4$
4	x^2y^2	$h^6[a + b(4 \cdot 13)/4 + c(4 \cdot 169)/4]/144 = h^4 4q/4$

При $c = 0$ получаем: $$a = \frac{258}{209},\ b = \frac{102}{209},\ p = \frac{140}{209},\ q = \frac{11}{209}.$$

В этом случае у обеих глобальных матриц доминирует главная диагональ. Следовательно, с помощью такой компактной разностной аппроксимации можно вычислить точечные значения по осредненным и, наоборот, осредненные по точечным.

Точность формулы проверим на осциллирующих экспонентах $\exp[i(\omega x + \eta y)/h]$, ω, η — безразмерные параметры. Символ функционала

$$\sigma_{krest-kvadrat}(\omega,\, \eta) = \frac{209 + 70\,[\cos(\omega) + \cos(\eta)] + 11\cos(\omega)\cos(\eta)}{258 + 51\,[\cos(\omega) + \cos(\eta)]}$$

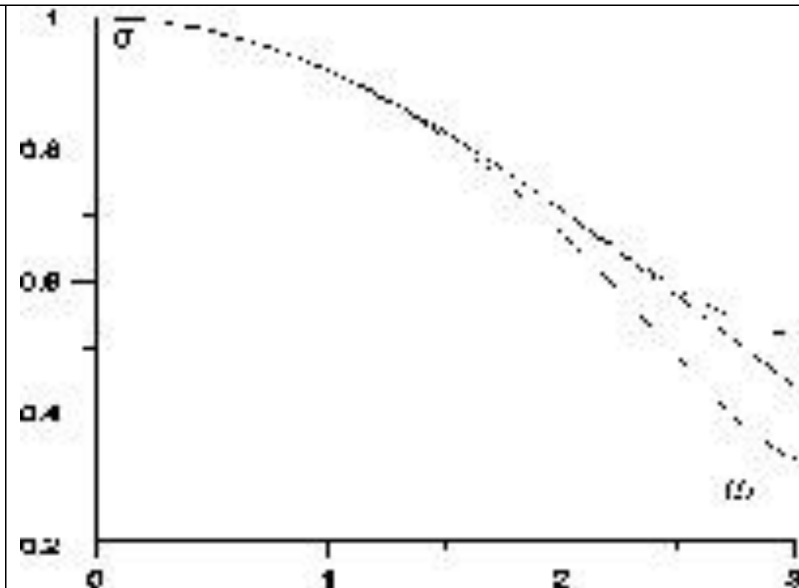
При $q = 0$ получаем:

$$a = \frac{247}{198},\ b = \frac{124}{198},\ c = \frac{-1}{18},\ p = \frac{9}{11}.$$

Здесь также главная диагональ доминирует у обеих матриц. Символ функционала

$$\sigma_{kvadrat-krest}(\omega,\, \eta) = \frac{198 + 81\,[\cos(\omega) + \cos(\eta)]}{247 + 62\,[\cos(\omega) + \cos(\eta)] - 11\cos(\omega)\cos(\eta)}.$$

Рис.5. Штрих-пунктир — символ функционала $\sigma_{kvadrat-krest}(\omega,\eta)$ на диагонали, т.е. при $\omega = \eta$; пунктир символ функционала $\sigma_{krest-kvadrat}(\omega,\eta)$; сплошная линия — символ эталонного функционала. Порядок точности у обоих разностных функционалов одинаковый, но первый вариант явно имеет меньшую погрешность.



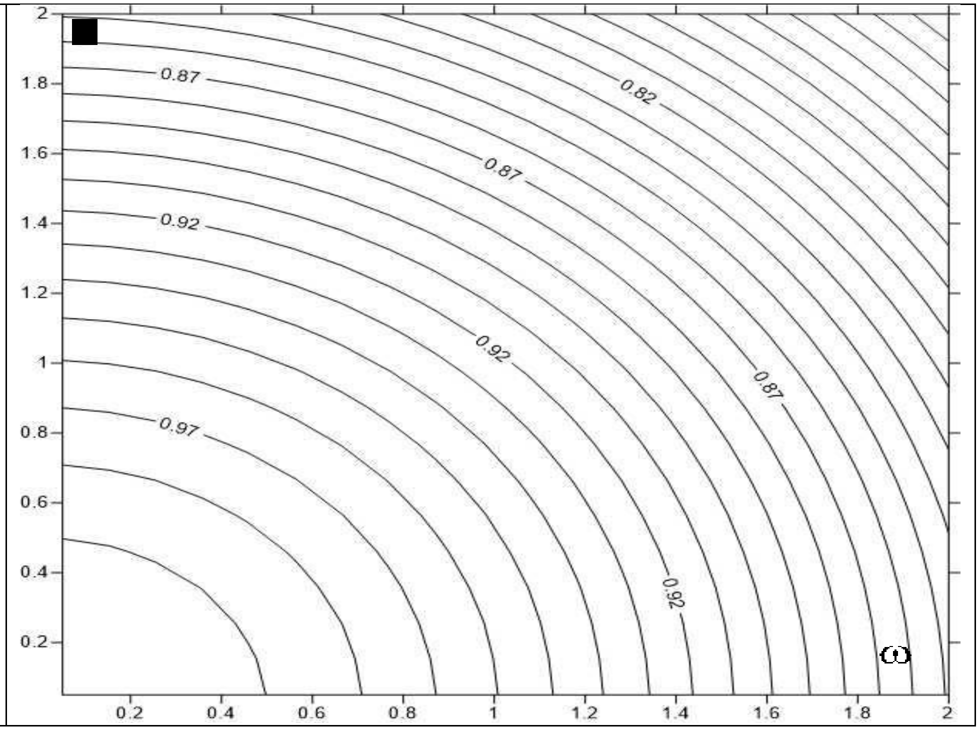


Рис.6 Символ эталонного функционала $\sigma_{эталон}(\omega,\eta)$. Здесь изолинии показаны не только на диагонали, а на всем квадранте. В остальные три квадранта продолжаем по четности по обеим переменным

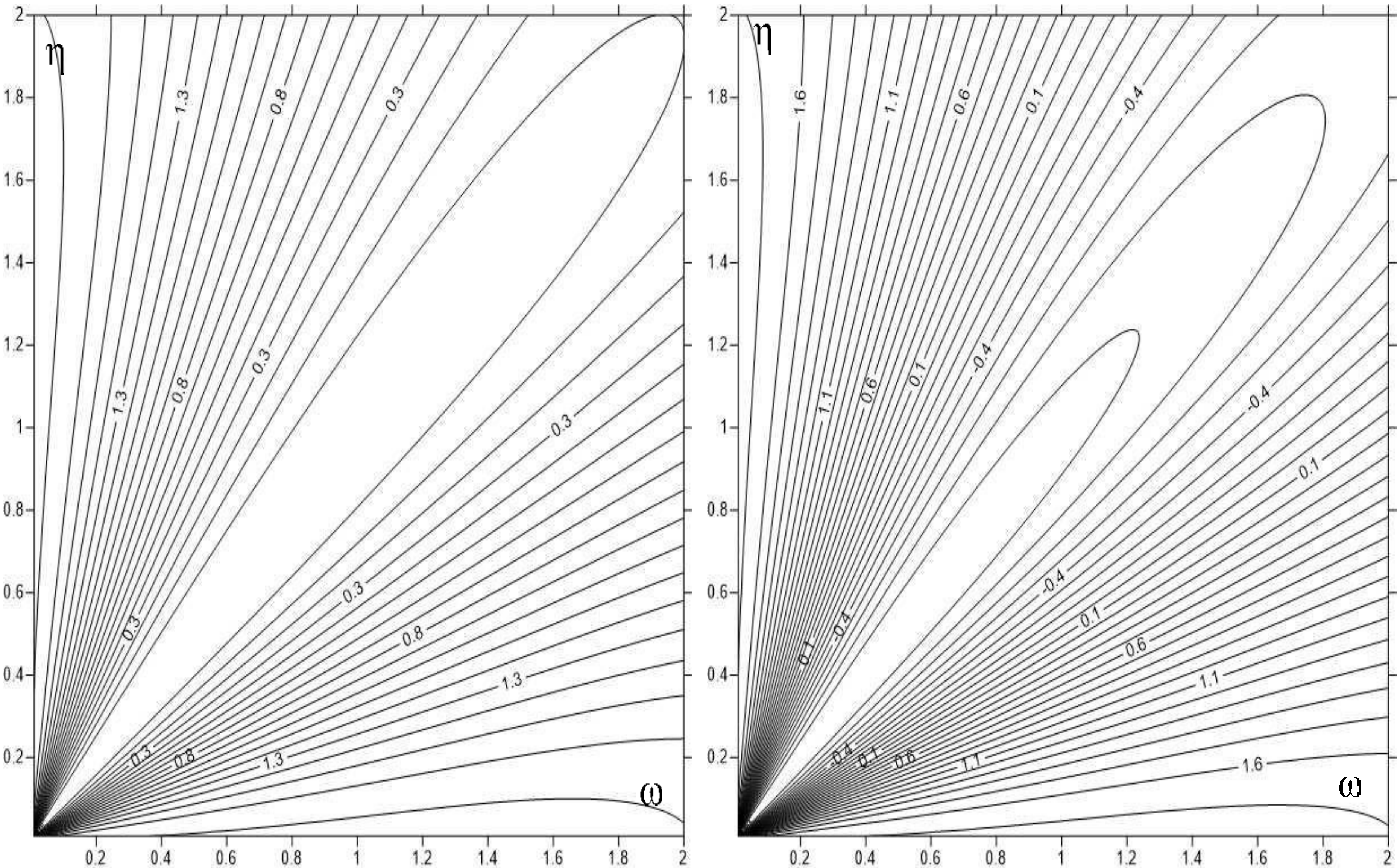


Рис.7. Нормированные разности символов эталонного функционала и компактного функционала а) вариант $c = 0$; б) вариант $q = 0$. В обоих случаях разность делится на $(\omega^2 + \eta^2)^3$ и умножается на 10^4.

Для нужных нам значений k получаем:

k	$h^{-(k+1)}I_{k,0}$	$h^{-(k+1)}I_{k,+}$	$h^{-(k+1)}I_{k,-}$
0	1	1	1
1	0	1	−1
2	1/12	13/12	−13/12
3	0	5/4	5/4
4	1/80	121/80	121/80
5	0	91/48	−91/48

Приложение 2. Несколько простых двумерных интегралов от функций $x^{2l}y^{2m}$.

k	m	$h^{-2(l+m)}I_{l,m\|0,0}$	$h^{-2(l+m)}I_{l,m\|\pm,0}$	$h^{-2(l+m)}I_{l,m\|0,\pm}$	$h^{-2(l+m)}I_{l,m\|\pm,\pm}$
0	0	1	1	1	1
1	0	1/12	13/12	1/12	13/12
2	0	1/80	121/80	1/80	121/80
1	1	1/144	13/144	13/144	169/144

Спасибо за внимание, коллеги